

非线性优化的保单调差分格式

李新亮, 冷岩

中国科学院力学研究所, 高温气体动力学国家重点实验室(筹), 北京海淀区 100190

摘要 采用保单调思想, 结合非线性优化, 构造了六阶精度的保单调差分格式(OMP6). 格式构造过程中采用非线性 Fourier 分析对格式的色散及耗散误差进行了优化. 通过 Shu-Osher, 双 Mach 反射以及 RT 不稳定性等算例对该格式进行了验证. 算例表明, 与常用的 WENO 等格式相比, 该格式(OMP6)具有格式简洁、计算量小、分辨率高等优点.

关键词 保单调, 优化, 差分格式

引言

高精度高分辨率数值方法在湍流的精细计算(DNS/LES)中发挥着重要作用. 对于可压缩湍流, 流场中的激波将给计算带来很大困难. 为了捕捉激波, 需引入一定的数值耗散以抑制数值振荡, 而过大的数值耗散会耗散掉湍流的小尺度脉动, 从带来较大的误差. 因而需要在激波捕捉与分辨小尺度之间进行平衡.

近年来, 以 WENO 格式^[1-2]为代表的高精度激波捕捉格式得到了广泛的应用. WENO 格式具有很好的鲁棒性及数值分辨率, 在可压缩湍流的精细模拟(DNS 及 LES)中应用尤为普遍. 但 WENO 格式仍有计算量大, 耗散偏大等不足之处, 需要进行改进. 目前针对 WENO 格式的优化与改进是高精度数值格式研究的热点, 比较有代表性的包括混合(hybrid) WENO 格式以及优化的 WENO 格式等.

与 WENO 格式的思想不同, Suresh 和 Huynh^[3]发展了一系列保单调格式(MP schemes), 这些格式与常用的 WENO 格式相比, 具有对小尺度波的高分辨率和计算效率高等优势. 保单调格式可以看成由两部分构成, 一是线性高阶部分, 二是保单调限制器部分. Suresh 和 Huynh 的研究主要是针对保单调限制器的改进, 而对线性高阶部分研究甚少. 在 Suresh 和 Huynh 的研究中建议线性高阶部分可以采用 5 阶或者 7 阶迎风格式. 本文以非线性谱分析方法为基础来研究线性部分的色散及耗散性质, 发现保单调格式的线性部分对整个格式的数值

表现同样有很大的影响. 对于真实的物理流动, 在低波数区域(光滑区), 保单调格式不调用限制器, 整个格式的数值表现完全由线性部分决定. 然而即使是在高波数区域(激波附近或者剧烈的干扰区域), 线性部分对整个格式的数值结果同样有很大的影响. 因此, 给出优化的线性部分对于保单调格式同样重要.

作者基于非线性谱分析方法对保单调格式进行了优化, 构造了六阶保单调差分格式(OMP6). 通过多个算例对格式进行了验证.

1. 数值格式

考虑标量双曲守恒律方程

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial f(u)}{\partial x} = 0 \quad (1)$$

其中: $f(u) = au$, $a > 0$

方程(3.1)的半离散形式为:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{1}{\Delta x}(f_{j+1/2} - f_{j-1/2}) = 0 \quad (2)$$

根据保单调格式[]的思想, 数值通量具有如下表达式:

$$f_{j+1/2} = f_{j+1/2}^{Linear} + MP \quad (3)$$

其中 $f_{j+1/2}^{Linear}$ 是格式的线性部分. MP 是格式的保单调限制器部分, 其具体形式见文[3]. 本文将根据耗散/色散优化的思想, 给出优化的 $f_{j+1/2}^{Linear}$. 在后续研究中作者将对保单调限制部分进行改进.

格式构造思路如下: 首先, 以带有自由参数的线性格式为基础来构造 6 阶线性格式; 其

次，对此线性格式添加保单调“限制器”来提高激波捕捉能力；最后，以非线性谱分析为基础确定优化后的系数。

1.1 带自由参数的六阶线性格式

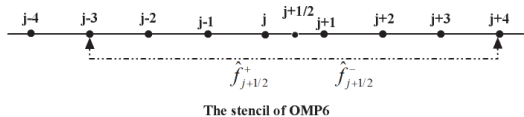


图 1. 构造 $f_{j+1/2}$ 使用的基架点

构造用来计算数值通量 的线性格式采用 8 点模板。明显地，对于 8 点模板，最高可以构造一个 8 阶线性格式。这里要求线性格式仅有 6 阶精度，因此在 8 个系数表达式 中有两个自由参数。格式表达式为：

$$f_{j+1/2}^{Linear} = \frac{\xi + \eta}{2} f_{j+4} + \left(\frac{1}{60} - \frac{7\xi + 5\eta}{2}\right) f_{j+3} + \left(-\frac{2}{15} + \frac{21\xi + 9\eta}{2}\right) f_{j+2} + \left(\frac{37}{60} - \frac{35\xi + 5\eta}{2}\right) f_{j+1} + \left(\frac{37}{60} + \frac{35\xi - 5\eta}{2}\right) f_j + \left(-\frac{2}{15} - \frac{21\xi - 9\eta}{2}\right) f_{j-1} + \left(\frac{1}{60} + \frac{7\xi - 5\eta}{2}\right) f_{j-2} - \frac{\xi - \eta}{2} f_{j-3} \quad (4)$$

1.2 添加保单调限制器

根据 Suresh 和 Huynh 的保单调限制技术^[3]，通过添加保单调限制器提高线性格式(4)的激波捕捉能力。在限制过程中，基本思路是不改变通量在光滑区的值，以保证在光滑区没有精度损失。在间断处，限制器发挥作用以保证单调性。添加限制器之后，得到带自由参数的保单调格式（MP-FP）：

$$f_{j+1/2} = \begin{cases} f_{j+1/2}^{Linear} & \text{if } (f_{j+1/2}^{Linear} - f_j)(f_{j+1/2}^{Linear} - f_{j+1/2}^{MP}) \leq \epsilon \quad (\epsilon = 10^{-10}) \\ f_{j+1/2}^{Linear} + \min \text{mod}(f_{j+1/2}^{\min} - f_{j+1/2}^{Linear}, f_{j+1/2}^{\max} - f_{j+1/2}^{Linear}) & \text{otherwise} \end{cases}$$

$$f_{j+1/2}^{MP} = f_{j+1/2}^{Linear} + \min \text{mod}[(f_{j+1} - f_j), 4(f_j - f_{j-1})]$$

$$f_{j+1/2}^{\max} = \min[\max(f_j, f_{j+1}, f_{j+1/2}^{MD}), \max(f_j, f_{j+1/2}^{UL}, f_{j+1/2}^{LC})]$$

$$f_{j+1/2}^{\min} = \max[\min(f_j, f_{j+1}, f_{j+1/2}^{MD}), \min(f_j, f_{j+1/2}^{UL}, f_{j+1/2}^{LC})] \quad (5)$$

1.3 由非线性 Fourier 分析对格式系数进行优化

添加限制器后，格式（5）为非线性格式，常规的线性 Fourier 分析给出的耗散/色散特性无法反映格式的真实特性。本文引入非线性 Fourier 分析，步骤如下：

1) 选取计算域 $[0, 2\pi]$ 和均匀的计算网格 $x_j = j\Delta x, (j=1, 2, \dots, N)$ ；

2) 给定波数 k ，生成每个网格点上的函数值

$$f_j = e^{ikx_j} ;$$

3)根据差分格式，计算导数值：

$$f_j' = \frac{f_{j+1/2} - f_{j-1/2}}{\Delta x} ;$$

4) 通过 Fourier 逆变换（DFT），得到导数的谱：

$$\hat{f}'_k = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N f_j' e^{-ikx_j}$$

根据修正波数的定义，有

$$\tilde{k} \equiv \hat{f}'_k \Delta x \equiv k_r + ik_i$$

5) 改变 k 值，重复过程(2)-(4)，得到 \tilde{k} 对于有效波数 $\alpha \equiv k\Delta x$ 的依赖关系。

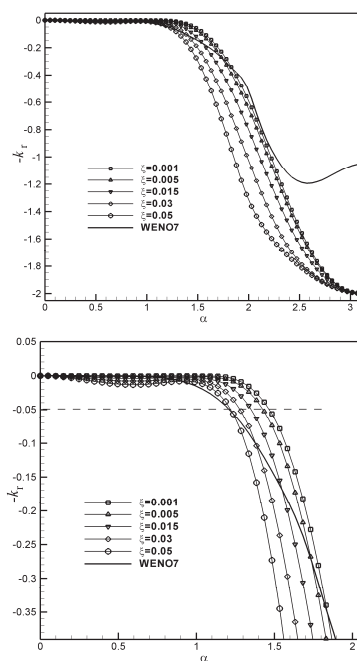


图 2. 不同 ξ 值格式的耗散曲线($\eta = 0$). (下图为上图的局部放大)

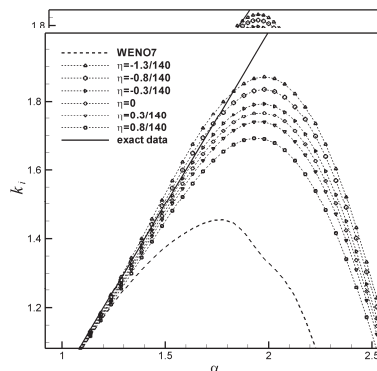


图 3. 不同 η 值格式的色散误差曲线 (下图为上图的局部放大)

图 2 和图 3 分别为对不同参数 ξ, η 的 MP-FP 格式的耗散及色散误差曲线。根据该曲线，对自由参数进行选择与优化。优化原则为令色散误差最小，耗散误差足够小（完全无耗散误差格式稳定性会变差，因而保留较小的耗散误差仍是需要的）。最终，选择了参数 $\xi = 0.001$ ， $\eta = 0$ 。于是格式为：

$$f_{j+1/2}^{Linear} = \frac{3}{6000}f_{j+4} + \frac{79}{6000}f_{j+3} - \frac{737}{6000}f_{j+2} + \frac{3595}{6000}f_{j+1} + \frac{3805}{6000}f_j - \frac{863}{6000}f_{j-1} + \frac{121}{6000}f_{j-2} - \frac{3}{6000}f_{j-3}$$

最终，OMP6 格式如下：

$$f_{j+1/2} = \begin{cases} f_{j+1/2}^{Linear} & \text{if } (f_{j+1/2}^{Linear} - f_j)(f_{j+1/2}^{Linear} - f_{j+1/2}^{MP}) \leq \epsilon \\ f_{j+1/2}^{Linear} + \min \text{mod}(f_{j+1/2}^{\min} - f_{j+1/2}^{Linear}, f_{j+1/2}^{\max} - f_{j+1/2}^{Linear}) & \text{otherwise} \end{cases}$$

$$f_{j+1/2}^{Linear} = \frac{3}{6000}f_{j+4} + \frac{79}{6000}f_{j+3} - \frac{737}{6000}f_{j+2} + \frac{3595}{6000}f_{j+1} + \frac{3805}{6000}f_j - \frac{863}{6000}f_{j-1} + \frac{121}{6000}f_{j-2} - \frac{3}{6000}f_{j-3}$$

$$f_{j+1/2}^{MP} = f_{j+1/2}^{Linear} + \min \text{mod}[(f_{j+1} - f_j), 4(f_j - f_{j-1})]$$

$$f_{j+1/2}^{\max} = \min[\max(f_j, f_{j+1}, f_{j+1/2}^{MD}), \max(f_j, f_{j+1/2}^{UL}, f_{j+1/2}^{LC})]$$

$$f_{j+1/2}^{\min} = \max[\min(f_j, f_{j+1}, f_{j+1/2}^{MD}), \min(f_j, f_{j+1/2}^{UL}, f_{j+1/2}^{LC})]$$

$$f_{j+1/2}^{UL} = f_j + 4(f_j - f_{j-1}) \quad ;$$

$$f_{j+1/2}^{MD} = \frac{1}{2}(f_j + f_{j+1}) - \frac{1}{2}d_{j+1/2}^M \quad ;$$

$$f_{j+1/2}^{LC} = \frac{1}{2}(3f_j - f_{j-1}) + \frac{4}{3}d_{j-1/2}^M \quad ;$$

$$d_{j+1/2}^M = \min \text{mod}(4d_j - d_{j+1}, 4d_{j+1} - d_j, d_j, d_{j+1}) \quad ;$$

$$d_j = f_{j-1} + f_{j+1} - 2f_j$$

2. 数值测试

2.1 Shu-Osher 问题^[4]

Shu-Osher 问题为运动激波与密度波干扰问题。此问题描述的是马赫数 3 的运动激波和空间正弦形式的密度波的相互干扰。此模型主要用来测试格式分辨率，包括对激波和小尺度波的分辨率。控制方程是一维守恒律的 Euler 方程组，初始条件为：

$$\begin{cases} \rho = 3.857143, u = 2.629369, p = 10.333333 & \text{when } x < 1 \\ \rho = 1 + 0.2 \sin(5x), u = 0, p = 1 & \text{when } x \geq 1 \end{cases}$$

计算区域为 $x \in [0, 10]$ ，网格数分别为 200 和 400，均匀网格；计算时间 $t = 1.8$ 。

图 4 给出了网格点为 200 时分别由 OMP6 和 WENO7 格式计算所得的密度数值结果，图

中的“准确解”是网格点加密到 4000 时得到的数值结果。可以看出，在网格相同的情况下，OMP6 的分辨率优于经典的 WENO7 格式。尤其是在激波后高波数密度脉动较为剧烈的区域，WENO7 格式计算得到的密度波峰值远小于 OMP6 格式得到的。OMP6 格式优异的高波数模拟能力是由于改进了格式色散性质。OMP6 格式优异的激波捕捉能力应归功于改进了格式的耗散性质。耗散应该尽量地减小，但另一方面它又要足够大抑制住振荡。表 6 给出了数值计算消耗的 CPU 时间。该表显示，在计算结果满意度相同的情况下，OMP6 格式的计算代价小于 WENO7 格式，计算时间仅为 WENO7 格式的一半左右，显示了该方法的计算效率。

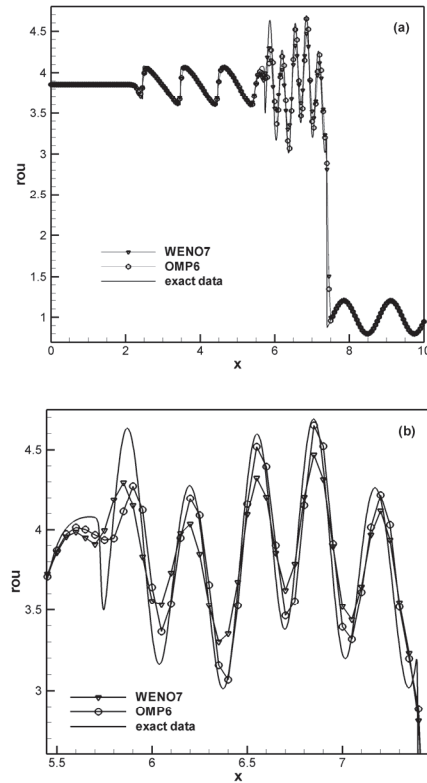


图 4. Shu-Osher 问题： $t = 1.8$ 密度分布，WENO7 和 OMP6，网格点：200
(下图为上图的局部放大)

表 1 Shu-Osher 问题所需 CPU 时间(18000 个时间步)

方法	总CPU时间(秒)	
	200 点	400 点
WENO7	13.39	26.67
OMP6	9.03	13.20

2.2 双马赫反射问题^[5]

双马赫反射问题描述如下：初始时刻，马赫数为 10 的右行正激波从 $x = 1/6, y = 0$ 处沿平板运动，激波与平板之间成 60° 夹角。激波前未扰动气流密度 $\rho = 1.4$ ，压力 $p = 1$ ， $\gamma = 1.4$ 。控制方程为二维 Euler 方程组。计算区域为 $[0, 4] \times [0, 1]$ ，使用 960×240 和 1920×480 的均匀网格，即 $\Delta x = \Delta y = \frac{1}{240}$ 和 $\Delta x = \Delta y = \frac{1}{480}$ ，计算时间为 $t = 0.2$ 。

图 6-9 给出了由 WENO7 和 OMP6 格式计算得到的密度等值线。可以看出，两种格式均捕捉到了物理问题的流动特征，如马赫杆、激波和滑移线。但 OMP6 格式更好地分辨率了波的结构和预测近壁面处的强射流；OMP6 格式达到了更高的分辨率，尤其是在马赫杆附近，OMP6 格式更清晰地捕捉到了滑移线的卷曲并且对小尺度量的耗散小。

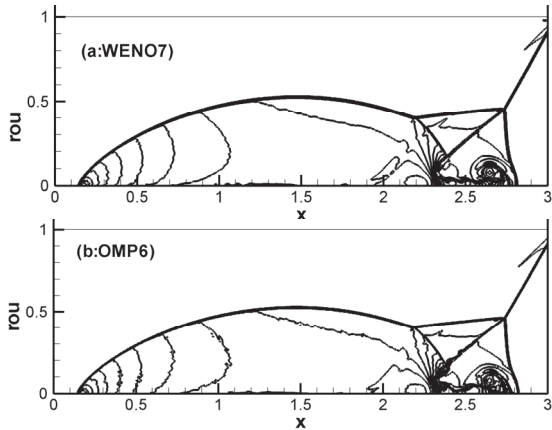


图 5 双马赫反射问题： $t = 0.2$ 密度等值线图；网格： 960×240 ；(a)WENO7；(b)OMP6 (从 17.31 到 20.92 共有 30 条等值线)

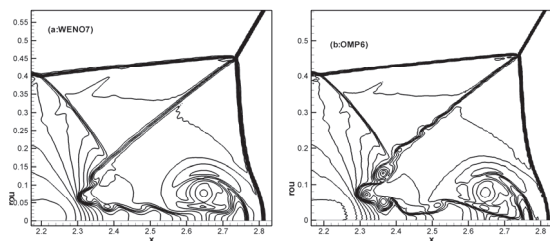


图 6：图 5 的局部放大图：左(WENO7)；右(OMP6)

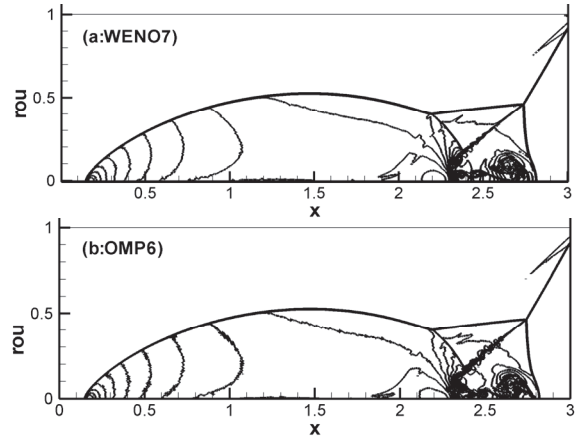


图 7. 双马赫反射问题： $t = 0.2$ 密度等值线图；网格： 1920×480 ；(a)WENO7；(b)OMP6 (从 17.31 到 20.92 共有 30 条等值线)

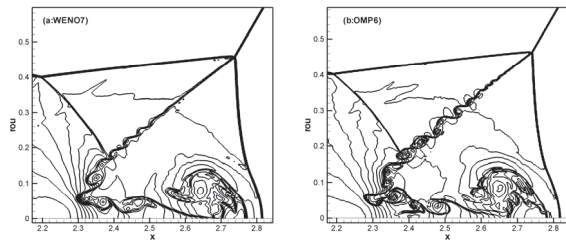


图 8. 图 7 的局部放大图：左(WENO7)；右(OMP6)

2.3 Rayleigh-Taylor 不稳定性^[6]

当两种密度不同的流体界面上有微小扰动，且由于某种原因从重流体到轻流体的方向产生加速度时，在这两种流体的界面上就会出现不稳定性，称为 Rayleigh-Taylor 不稳定性（简称 RT 不稳定性）。Rayleigh-Taylor 不稳定性广泛存在于天体物理、核物理和流体力学等领域。以往的研究表明，Rayleigh-Taylor 不稳定性包含很多细致结构，因此这是一个测试数值格式分辨率的很好算例。该问题的具体描述见文[6]

为了便于对数值结果进行比较，采用了三种逐渐加密网格 $h = 1/240, 1/480, 1/960$ 对该问题进行了计算。图 31 给出了在网格尺度分别为 $h = 1/240$ 和 $1/480$ 时由 WENO7 和 OMP6 格式计算得到的密度等值线。表 9 则给出了 Rayleigh-Taylor 不稳定性问题每计算 100 步所需的 CPU 时间。从图中可以看出，密度较大的流体呈长穗状流入密度较小的流体中，经过一定的时间后，长穗状流团的前面就形成了类似于蘑菇的形状，并且两流体之间的界面

向上移了一定的距离。两种格式所得的数值解基本一致，都具有较好的精度和分辨率，而且能很好的保持质量守恒，但是细节上仍有一些差别。与 WENO7 相比，OMP6 格式对蘑菇状结构和下面及两侧小尺度漩涡结构的耗散小，在剪切层模拟出了更多的小涡结构。这表明，当数值解包含很多复杂结构的时候，OMP6 格式的分辨率更高。

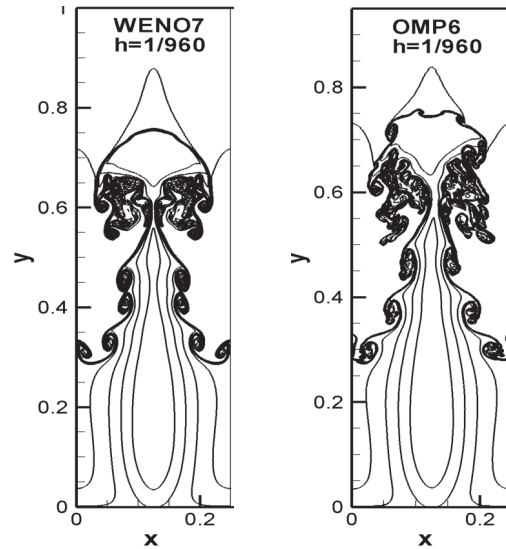
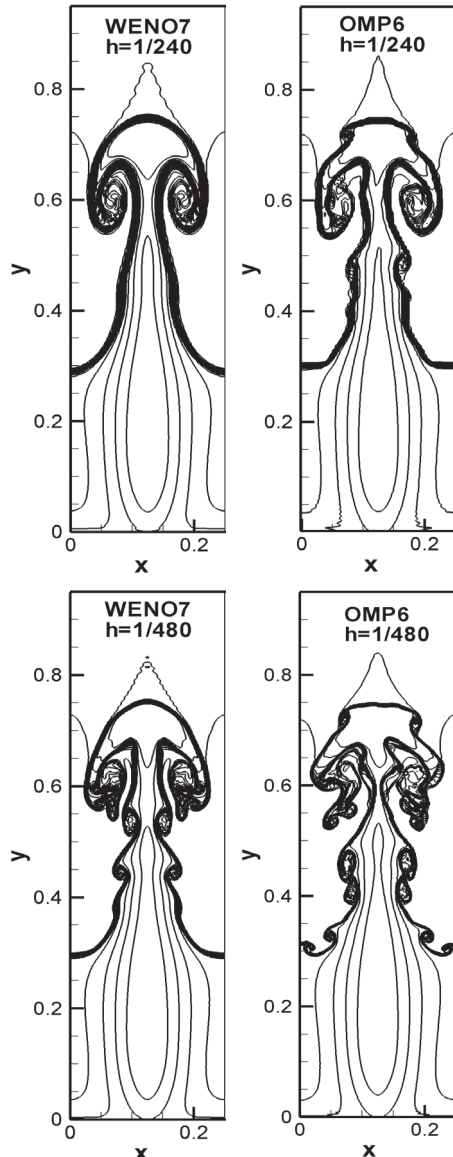


图 9. Rayleigh-Taylor 不稳定性问题: $t = 1.95$ 密度分布; 网格: $h = 1/240, 1/480, 1/960$; 数值格式: WENO7 和 OMP6 (从 0.952269 到 2.14589 共有 15 条等值线)

3 结 论

采用保单调思想, 结合非线性优化, 构造了六阶精度的保单调差分格式(OMP6). 格式构造过程中采用非线性 Fourier 分析对格式的色散及耗散误差进行了优化。通过 Shu-Osher, 双 Mach 反射以及 RT 不稳定性等算例对格式的分辨率及计算效率进行了测试。算例表明, 与常用的 WENO 等格式相比, 该格式具有更高的尺度分辨率及计算效率。

参考文献

1. X.D. Liu, S. Osher, T. Chan, Weighted essentially non-oscillatory schemes, *J. Comput. Phys.* 115 (1994) 200-212.
2. G.S. Jiang, C.W. Shu, Efficient implementation of weighted ENO schemes, *J. Comput. Phys.* 126 (1996) 202-228.
3. A. Suresh, H.T. Huynh, Accurate Monotonicity-Preserving Schemes with Runge-Kutta Time Stepping, *J. Comput. Phys.* 136(1997) 83-99.
4. C.W. Shu, S. Osher, Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-wave schemes, II, *J. Comput. Phys.* 83 (1989) 32-78.
5. P. Woodward, P. Colella, The numerical simulation of two-dimensional fluid flow with strong shocks, *J. Comput. Phys.* 54 (1984) 115-173.
6. J. Shi, Y.T. Zhang, C.W. Shu, Resolution of high order WENO schemes for complicated flow structures, *J. Comput. Phys.* 186 (2003) 690-696.